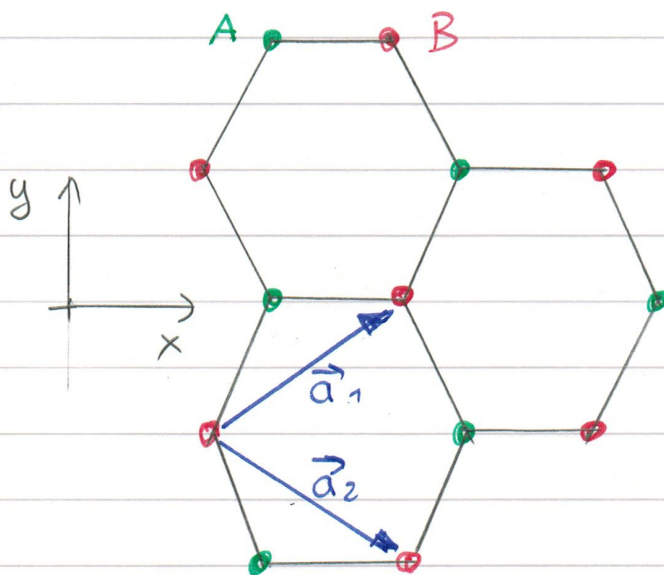


5. Chern Isolatoren auf Honigwabenlittern: Graphene und Haldane Modell

Eine wichtige und interessante Klasse von Chern Isolatoren basieren auf Gittermodellen von Fermionen mit Honigwabensstruktur (hexagonale Gitter)

5.1 Graphene und Dirac Fermionen

(A) Gitterstruktur und tight-binding Hamiltonian



Gitter mit Einheitszelle
aus 2 Gitterplätzen
(A, B)

Gittervektoren

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}) \quad (4.17)$$

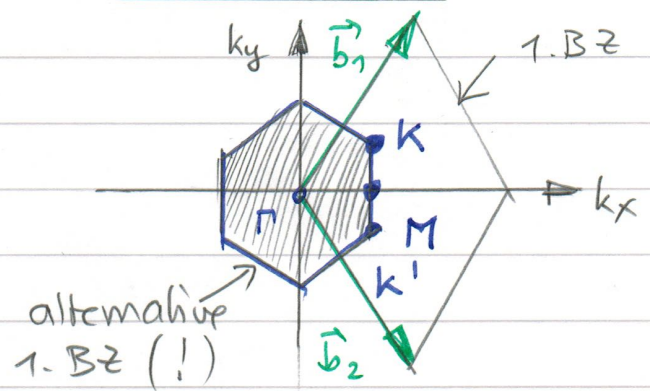
$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3})$$

reziproke Gittervektoren

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3})$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3})$$

Brillouinzone



meist verwendete BZ: Hexagon mit Ecken

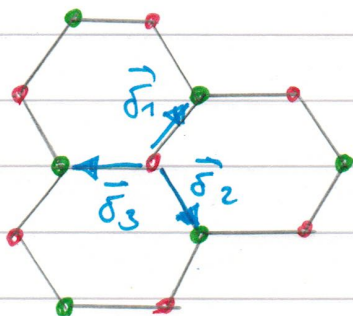
$$(5.1) \quad \vec{K} \triangleq \frac{2\pi}{3a} \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad \vec{K}' \triangleq \frac{2\pi}{3a} \left(1, -\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

$\vec{K}$ und $\vec{K}'$ sind TR invariante Punkte, denn

$$\vec{K} \rightarrow -\vec{K} = \vec{K}' - (\vec{b}_1 + \vec{b}_2)$$

Der einfachste tight-binding Hamiltonian auf dem hexagonalen Gitter ist

$$(5.2) \quad H = \sum_{\vec{b}} \begin{pmatrix} \hat{C}_{A\vec{b}}^\dagger & \hat{C}_{B\vec{b}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sum_{j=1}^3 t_j e^{i\vec{b}_j \cdot \vec{\delta}_j} \\ \sum_{j=1}^3 t_j e^{-i\vec{b}_j \cdot \vec{\delta}_j} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{C}_{A\vec{b}} \\ \hat{C}_{B\vec{b}} \end{pmatrix}$$



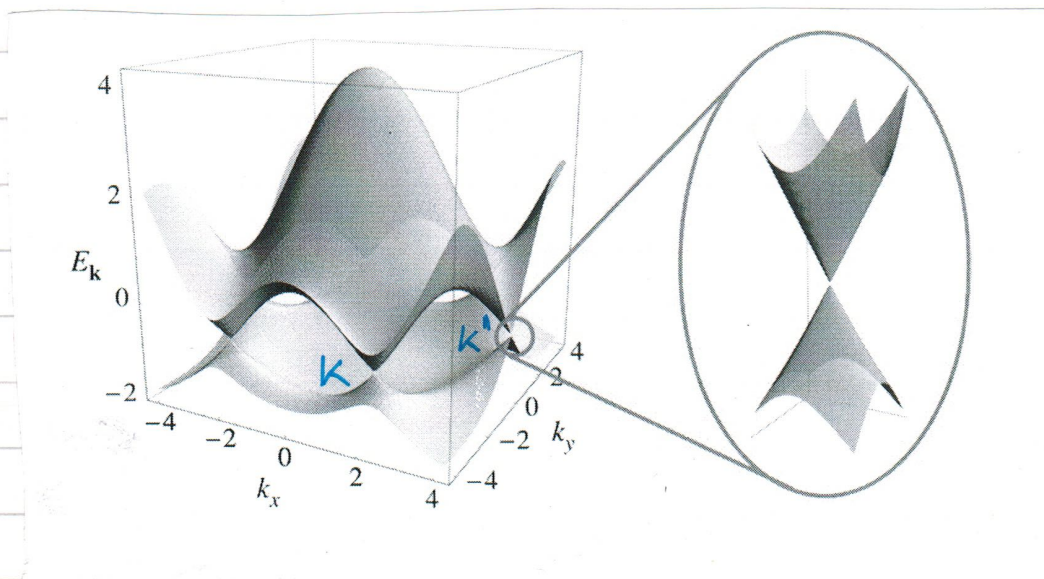
mit zusätzlicher Eichtransformation

$$\hat{C}_{B\vec{b}} \rightarrow \hat{C}_{B\vec{b}} e^{i\vec{b} \cdot \vec{\delta}_3}$$

erhält man aus (4.19) die Bloch-Form

$$(5.3) \quad H = \sum_{\vec{b}} \begin{pmatrix} C_{A\vec{b}}^\dagger & C_{B\vec{b}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -t_a e^{i\vec{b}\vec{a}_1} - t_b e^{i\vec{b}\vec{a}_2} - t_c \\ \text{c.c.}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{A\vec{b}} \\ C_{B\vec{b}} \end{pmatrix}$$

Da die Einheitszelle aus zwei Gitterplätzen besteht (A, B) hat das tight-binding Modell 2 Bänder



Dirac-artige Dispersion an Punkten $\vec{K}$ und $\vec{K}'$

"Dirac-Punkte"

Dirac Fermionen

Graphene ist Semi-Metall da die Bandlücke verschwindet aber nur an zwei diskreten Punkten im $\vec{k}$ -Raum.

in der Nähe von $\vec{K}$ und $\vec{K}'$

(5.41)

$$h(\vec{K} + \delta\vec{k}) = \delta k_x \sigma_x + \delta k_y \sigma_y$$

$$h(\vec{K}' + \delta\vec{k}) = -\delta k_x \sigma_x + \delta k_y \sigma_y$$

σ_x, σ_y
Pauli
Matrizen
in (x, y) Ebene

(B) Symmetrien von Graphene

(i) In der Nähe der Dirac Punkte, d.h. für $E \approx 0$ gilt

$$h(\vec{K} + \delta\vec{k})^* = \delta k_x \sigma_x - \delta k_y \sigma_y = h(-\vec{K} - \delta\vec{k})$$

(5.5)

$$THT^{-1} = H$$

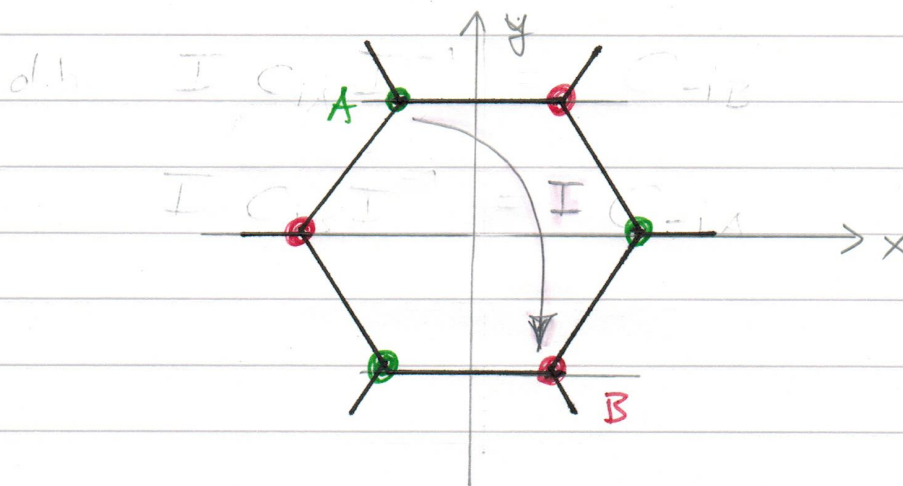
 $E \approx 0$

d.h. H ist TR-symmetrisch für $E \approx 0$

(zu Erinnerung $Th(h)T^{-1} = h(h)^* = h(-\vec{b})$)

(ii) Graphene ist inversionssymmetrisch

$$I: (x, y) \longleftrightarrow (-x, -y)$$



Inversionssymmetrie in einer Einheitszelle, aus zwei Gitterplätzen

$$I C_{iA} I^{-1} = C_{-iB}$$

$$I C_{iB} I^{-1} = C_{-iA}$$

(5.6)

$$I C_{ia} I^{-1} = \sigma_{aa'}^x C_{-ia'}$$

Im Fourerraum

$$\begin{aligned} I C_{\vec{b}a} I^{-1} &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{b}'} e^{i\vec{b}\vec{b}'} I C_{ja} I^{-1} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{b}'} e^{i\vec{b}\vec{b}'} C_{-ja'} \sigma_{aa'}^x \\ &= \sigma_{aa'}^x \delta_{-\vec{b}a'} \end{aligned}$$

Ein Hamiltonoperator auf einem Gitter mit Einheitszelle bestehend aus 2 Gitterplätzen ist inversionssymmetrisch,

$$(5.7) \quad I H I^{-1} \stackrel{!}{=} H$$

falls

$$\begin{aligned} I H I^{-1} &= \sum_{\vec{b}} I C_{\vec{b}\alpha}^{\dagger} h_{\alpha\beta}(\vec{b}) C_{\vec{b}\beta} I^{-1} \\ &= \sum_{\vec{b}} \sigma_{\alpha\gamma}^{\dagger} C_{-\vec{b}\gamma}^{\dagger} I h_{\alpha\beta}(\vec{b}) I^{-1} \sigma_{\beta\lambda}^{\dagger} C_{\vec{b}\lambda} \\ &= \sum_{\vec{b}} C_{\vec{b}\gamma}^{\dagger} \left[\sigma_{\alpha\gamma}^{\dagger} I h_{\alpha\beta}(\vec{b}) I^{-1} \sigma_{\beta\lambda}^{\dagger} \right] C_{\vec{b}\lambda} \\ &\stackrel{!}{=} \sum_{\vec{b}} C_{\vec{b}\gamma}^{\dagger} h_{\gamma\lambda}(\vec{b}) C_{\vec{b}\lambda} \end{aligned}$$

$$(5.8) \quad \boxed{\sigma_{\gamma\alpha}^{\dagger} h_{\alpha\beta}(-\vec{b}) \sigma_{\beta\lambda}^{\dagger} \stackrel{!}{=} h_{\gamma\lambda}(\vec{b})}$$

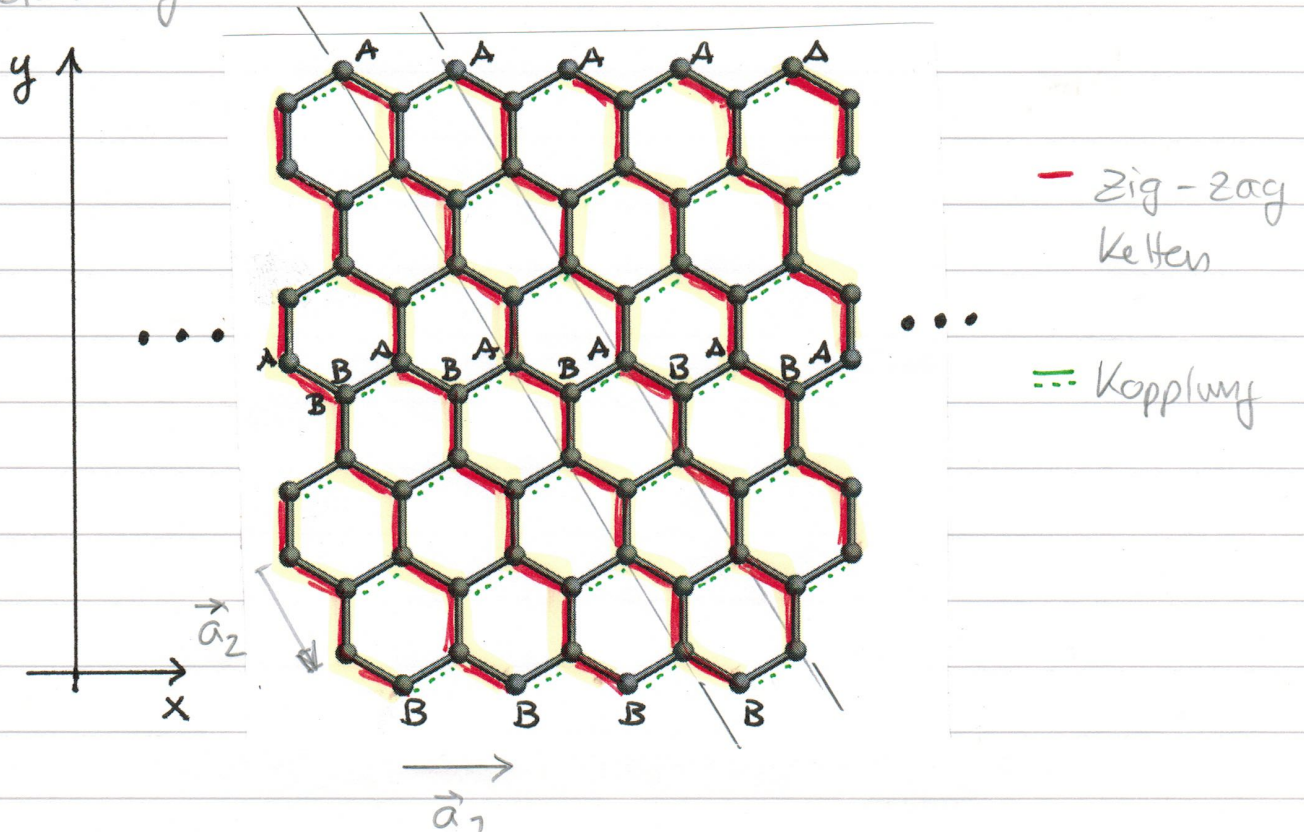
Dies ist für Graphene der Fall!

Man kann zeigen;

Die Existenz der Dirac Punkte ist durch die kombinierte TR und I Symmetrie gesichert

(C) Randmoden von Graphene

Betrachten Graphene mit offenen RB in der zig-zag Richtung und periodischen RB in der orthogonalen Richtung.



periodische RB in x Richtung $\Rightarrow$ gekoppelte 1-D Ketten

F-Trafo bzgl. x

$$(5.9) \quad c_{x,y}^+ = \frac{1}{L_x} \sum_{k_x} e^{ik_x x} \tilde{c}_{k_x,y}^+$$

Annahme: $t_a = t_b = t_c = t$

$$H = -t \sum_{j,k_x} (C_{k_x 2j}^+ C_{k_x 2j+1} + \text{h. a.})$$

$$-t \sum_{j,k_x} \left[C_{k_x 2j}^+ C_{k_x 2j-1} (e^{ik_x \frac{a_1}{2}} + e^{-ik_x \frac{a_1}{2}}) + \text{h. a.} \right]$$

wobei $a_1 = \frac{a}{2} \sqrt{3}$

Eichkraft $C_{2j-1} \rightarrow C_{2j-1} e^{ik_x a_1/2}$
 liefert

$$H = -t \sum_{j,k_x} \left[C_{k_x 2j}^+ C_{k_x 2j+1} + C_{k_x 2j}^+ C_{k_x 2j-1} (1 + e^{-ik_x a_1}) + \text{h. a.} \right] \quad (5.10)$$

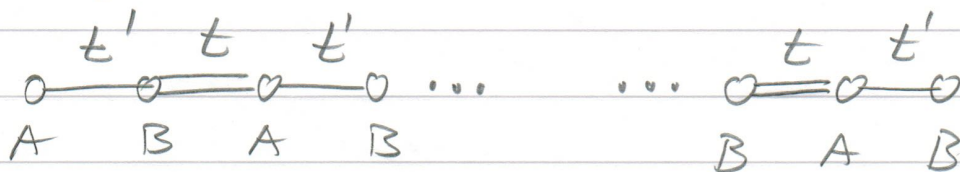
(4.27)

SSH Modell für jedes k_x !

$$2j-1 \leftrightarrow 2j \quad t(1 + e^{-ik_x a_1}) = t'$$

$$2j \leftrightarrow 2j+1 \quad t$$

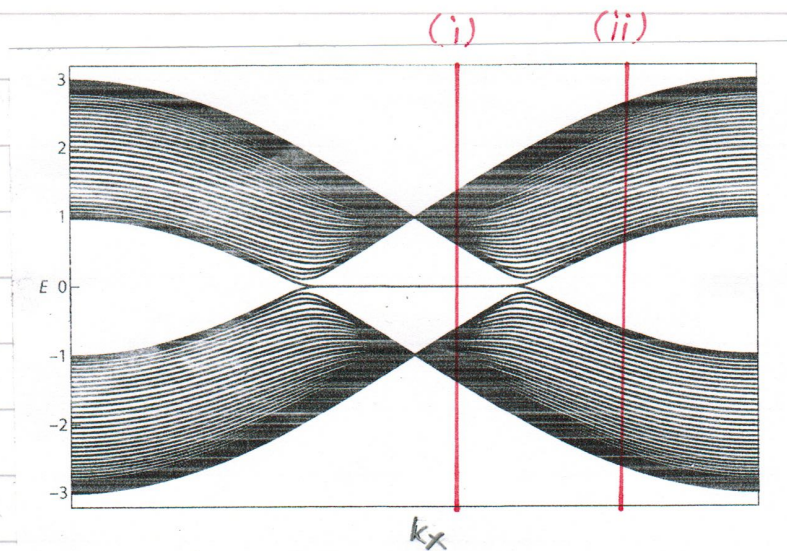
Ketten gehen von "A" Punkt auf "B" Punkt



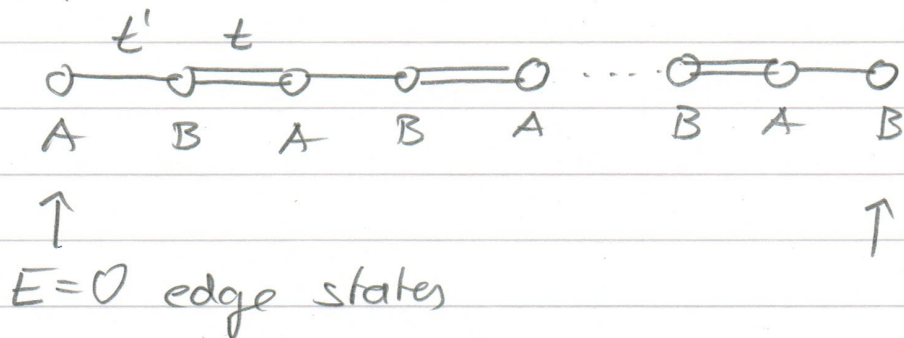
$$|t'| = |1 + e^{-ik_x a_1}| t = \sqrt{2} \left| \cos\left(\frac{k_x a_1}{2}\right) \right| t$$

$\Rightarrow \exists$ Randzustände mit Energie $E=0$ für alle k_x mit

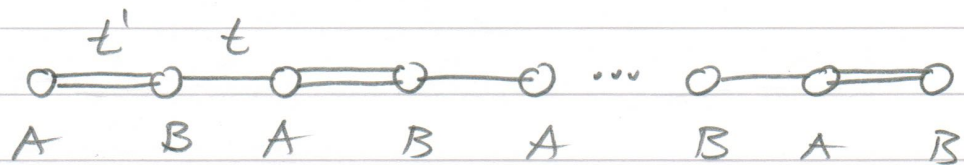
$$(5.11) \quad \cos \frac{k_x a_1}{2} \leq \frac{1}{\sqrt{2}}$$



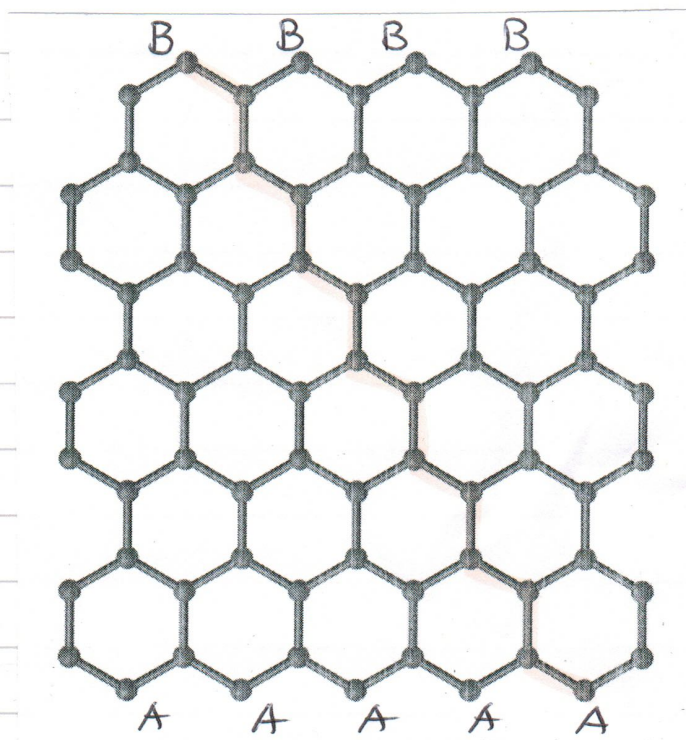
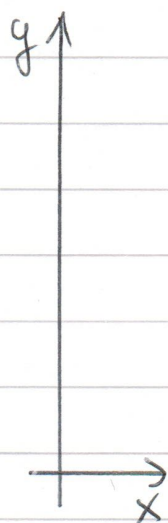
(i) SSH Modell mit $|t'| < t$



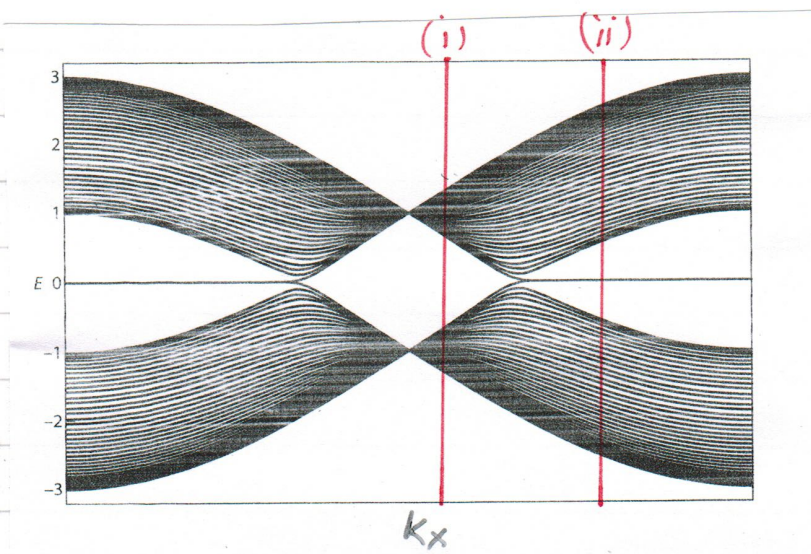
(ii) SSH Modell mit $|t'| > t$



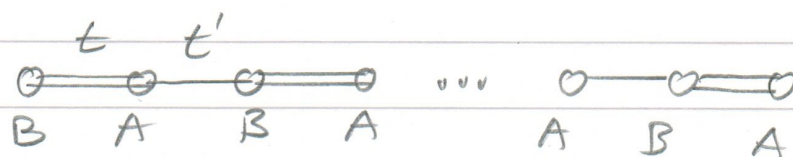
keine Edge states



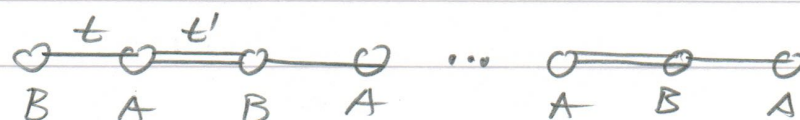
Kette von $B \rightarrow A$



(i) SSH Modell mit $|t'| < t$

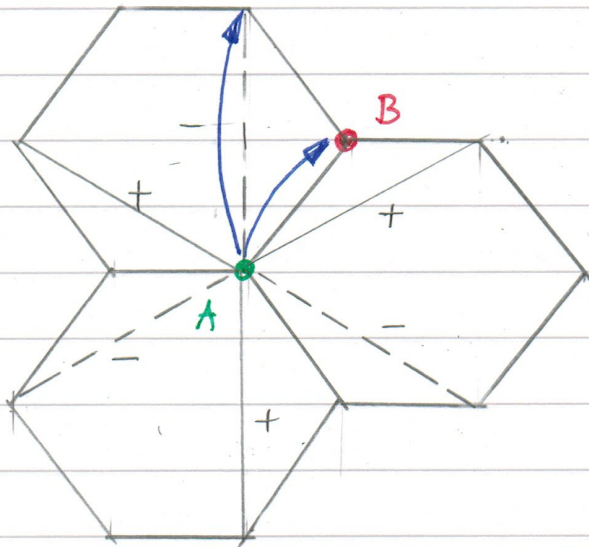


(ii) SSH Modell mit $|t'| > t$



5.2 Haldane Modell

F.D.M. Haldane Phys. Rev. Lett. 61, 2015 (1988)



Graphene Modell
mit Hüpfern zu
nächsten $\langle ij \rangle$ und
übernächsten $\langle\langle ij \rangle\rangle$
Nachbarn

$$(5.12) \quad H = t_1 \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j + t_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} e^{-i\nu_{ij}\phi} c_i^\dagger c_j + m \sum_j \varepsilon_j c_j^\dagger c_j$$

$$\varepsilon_j = \begin{cases} +1 & \text{A site} \\ -1 & \text{B site} \end{cases} \quad \nu_{ij} = \text{sgn}(\vec{d}_1 \times \vec{d}_2)_z$$

Fourier-Transformation von (5.12) liefert

$$H = \sum_{\vec{k}} (c_{A\vec{k}}^\dagger, c_{B\vec{k}}^\dagger) \underline{h}(\vec{k}) \begin{pmatrix} c_{A\vec{k}} \\ c_{B\vec{k}} \end{pmatrix}$$

mit

$$(5.13) \quad \underline{h}(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k}) + \sum_{j=1}^3 d_j(\vec{k}) \sigma_j$$

mit

$$\begin{aligned} \varepsilon(\vec{b}) &= 2t_2 \cos \phi \left[\cos(\vec{b} \cdot \vec{a}_1) + \cos(\vec{b} \cdot \vec{a}_2) \right. \\ (5.14) \quad &\quad \left. + \cos(\vec{b} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2)) \right] \end{aligned}$$

$$d_1(\vec{b}) = t_1 \left[\cos(\vec{b} \cdot \vec{a}_1) + \cos(\vec{b} \cdot \vec{a}_2) + 1 \right]$$

$$\begin{aligned} d_2(\vec{b}) &= t_1 \left[\sin(\vec{b} \cdot \vec{a}_1) + \sin(\vec{b} \cdot \vec{a}_2) \right] \\ (5.15) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} d_3(\vec{b}) &= m + 2t_2 \sin \phi \left[\sin(\vec{b} \cdot \vec{a}_1) \right. \\ &\quad \left. - \sin(\vec{b} \cdot \vec{a}_2) - \sin(\vec{b} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2)) \right] \end{aligned}$$

(A) Symmetrieeigenschaften

► TR Invarianz (die $\vec{a}_j$ in H sind
keine echten Spins!)

$$\varepsilon(\vec{b}) = \varepsilon(-\vec{b}) \quad \checkmark$$

$$d_1(\vec{b}) = d_1(-\vec{b}) \quad \checkmark \quad d_2(\vec{b}) = -d_2(-\vec{b}) \quad \checkmark$$

$$\text{aber:} \quad d_3(\vec{b}) = d_3(-\vec{b}) \quad \underline{\underline{\text{nur f\"ur } \phi = 0, \pi}}$$

$\Rightarrow$ Haldane Modell TR invariant f\"ur

$$\phi = 0, \phi = \pi$$

► Inversion

$$\varepsilon(\vec{b}) = \varepsilon(-\vec{b}) \quad \checkmark$$

$$d_1(\vec{b}) = d_1(-\vec{b}) \quad \checkmark \quad d_2(\vec{b}) = -d_2(-\vec{b}) \quad \checkmark$$

$$\text{aber } d_3(\vec{b}) = -d_3(-\vec{b}) \quad \underline{\underline{\text{nur f\"ur } m=0}}$$

$\Rightarrow$ Haldane Modell I-invariant nur
f\"ur verschwindenden Massenterm, d.h. $m=0$

$$d_3 = m + 2t_2 \sin \phi \left[\sin(\vec{b} \cdot \vec{a}_1) - \sin(\vec{b} \cdot \vec{a}_2) - \sin(\vec{b} \cdot (\vec{a}_1 - \vec{a}_2)) \right]$$



I breaking



TR breaking

Kombination aus I und TR breaking Termen gibt
Haldane Modell nichttriviale Eigenschaften

